A product space of ${0, 1}$ of an abstract polycrystal (Research Trends on Set-theoretic and Geometric Topology and their cooperation with various branches)

AUTHOR(S):

大森, 祥輔

CITATION:

大森, 祥輔. A product space of ${0, 1}$ of an abstract polycrystal (Research Trends on Set-theoretic and Geometric Topology and their cooperation with various branches). 数理解析研究所講究録 2018, 2064: 53-58

ISSUE DATE:

2018-04

URL:

http://hdl.handle.net/2433/241891

数理解析研究所講究録
第2064巻 2018年 53-58

A product space of {0,1} of an abstract polycrystal

早稲田大学理工学術院　大森　祥輔
Shousuke Ohmori
Faculty of Science and Engineering, Waseda University

準結晶や非晶質，アモルファス物質は従来の結晶に見られる対称性や周期性をもたないことが知られている [1, 2, 3]. このため，回折結晶学で用いられてきた群論的手法ではこれらの物質の構造を研究するのには限界があり，より汎用性の高い数理科学的手法が求められている. 実際，結晶点群において，従来の結晶学で許される対称性は Cn, n=2, 3, 4, 6 であるが，これ以外の Cn をもつ準結晶の存在が確認されている. また，非晶質やアモルファス構造をもつ物質には，そもそも特徴的な周期性が存在しないため群論の方法が使えない. これまでは, 与えられた個別の物質毎にその構造解析を行い，物質の特徴づけを行ってきた. したがって，物質の詳細 (周期性など) によらない統一的立場からの研究，及び群論以外の数学的手法の研究が，これらの物質構造を解明するために必要である. このような状況にあって、本研究では，物質 (空間) を固定して，その粗視化された空間としてどのような構造が内在し得るのかという，これまでとは全く異なる観点からの，物質構造 (凝集体構造) の議論の方法を提案する. すなわち,「はじめの物質 (これを X とおく) が，どのような幾何学的特徴を有していれば，その粗視化されたもので特定の構造 S を持つものが存在するか」，という観点での議論である. また, 物質の詳細によらない統一的立場から議論することで, 液体-液体相転移 [4, 5] に見られるような, 異なるネットワーク配位をもつ原子凝集体の構造に関しても, 同様な議論を適用することができる [6]. ここでは, 上記の観点を一つの問題 $(*)$ と捉えて, その十分条件の導出を議論する.

まず, はじめの物質を位相空間 (X, τ) とし, その粗視化を A.Fernández[7] に従って次のように定義する.

[定義] 位相空間 (X, τ) の分解空間 $(\mathcal{D}, \tau(\mathcal{D}))$ を X の数学的粗視化（以後、単に粗視化）という.

ここで次の問 「はじめの空間 X がどのような性質を持てば, その性質を保存したままの粗視化列が得られるか」を考えると, その十分条件として次の A) を得る.

A) 位相空間 (X, τ) が 0-dim(ゼロ次元)，perfect，T_0 空間ならば，ある分解空間列 $\{\mathcal{D}^0, \mathcal{D}^1, \mathcal{D}^2, \cdots\}$ が存在し，各分解空間 $\mathcal{D}^i$ は 0-dim，perfect，T_0 空間となる. $(X = \mathcal{D}^0)$

ここで, 各 $\mathcal{D}^i$ は $\mathcal{D}^{i-1}$ の non-trivial(i.e., $\mathcal{D}^i \neq \{\{x\}; x \in \mathcal{D}^{i-1}\}$) な分解空間である. A) の証明は, 文献 [8, 9] を参照されたい. 注意として, X が 0-dim, perfect であり, さらに compact, 距離空間である場合は, A) における分解空間 $\mathcal{D}^i$ は互いに同相となる. 実際, 各分解空間は 0-dim, perfect, compact 距離空間となり, CMTS に同相となる. すなわち Cantor set となる. したがって, CMTS を介して各分解空間は同相として結ばれる. これは互いに同相となる粗視化列を得ることを意味する.

X が 0-dim, perfect, T_0 空間である場合以外にも, X が Peano continuum (連結で局所連結な compact 距離空間) であるとき, その各分解空間がまた Peano continuum であるところの分解空間列, すなわち粗視化列が存在する. この事実は, 任意の Peano continuum は連結な正規空間の連続像として表現される [10] ことを用いて示す事ができる.

続いて, 問題 $(*)$ の十分条件を考えよう. 今回, 特定の物質の構造もしくは形態 S は compact 距離空間とする. 実際の物質科学における構造, 例えば過冷却によって成長した dendrite を考えると, その位相構造は単純閉曲線を含まない Peano continuum として定義される [10]. その他, 結晶成長の一つとして得られる粒状パーライトも B^2(半径 1 の閉球に同相な空間) と arc(閉区間 $[0, 1]$ と同相な空間) との和として位相的にその構造を特徴づけることが可能である. この空間もまた, Peano continuum になることが示される. したがって, 粗視化の定義を考慮することで, 問題 $(*)$ は「任意に与えられた compact 距離空間 S に対して, 位相空間 (X, τ) がどのような性質を持っていれば, X の分解空間（粗視化）$\mathcal{D}$ が存在し, S と $\mathcal{D}$ とが同相となるか」という数学的な問題に帰着する. この問題の十分条件を与えるために, 次の事実 B) を用いる.

B) 位相空間 (X, τ) が 0-dim, perfect, compact, T_0 空間とする. 任意に与えられた compact 距離空間 S に対して, X の分解空間 $\mathcal{D}$ が存在し, S と $\mathcal{D}$ とが同相となる.

B) を詳しく見ていく. まず分解空間に関する次の命題が知られている [11].

<u>命題 1</u> (X, τ) と (Y, τ') を位相空間とし, $f : (X, \tau) \to (Y, \tau')$ を商写像とする. このとき $h : (Y, \tau') \to (\mathcal{D}_f, \tau(\mathcal{D}_f))$, $y \mapsto f^{-1}(y)$ は同相写像となる. ただし, $\mathcal{D}_f = \{f^{-1}(y) \subset X; y \in Y\}$, $\tau(\mathcal{D}_f) = \{\mathcal{U} \subset \mathcal{D}_f; \bigcup \mathcal{U} \in \tau\}$ である.

したがって, (X, τ) の分解空間 $(\mathcal{D}_f, \tau(\mathcal{D}_f))$ は (Y, τ') と同じ位相的な属性をもつことになる. また, 商写像 $f : X \to Y$ が存在するための条件として, 次の命題を考える [9, 11].

<u>命題 2</u> (X, τ) が 0-dim, perfect な compact T_2 空間ならば, 任意の compact 距離空間 (Y, τ_d) に対して連続全射 $f : (X, \tau) \to (Y, \tau_d)$ が存在する.

命題 2 において, (X, τ) は compact 空間, (Y, τ_d) は T_2 空間であることから, 連続全射 f は商写像となる. したがって, 命題 1 から Y と同相となるような, X の分解空間が存在する. 一般に, 0-dim な T_0 空間は T_2 空間になることが知られているので, 以上の結果として B) が成立する. 今, X を 0-dim, perfect, compact な T_2 空間として, (Y, τ_d) とし

て dendrite を取ろう．B) から，dendrite に同相な X の分解空間 $\mathcal{D}$ が存在する．上に述べたように，dendrite の幾何学的特徴は全て位相的性質なもので定められるので，$\mathcal{D}$ もまた dendrite となる．以上から，はじめの物質の状態 X が 0-dim, perfect, compact な T_0 空間となるところの幾何学的状態 (この状態を K 状態と呼ぼう) であることが，最初に挙げた問題 (*) に対する十分条件であることが分かった．言い換えれば，任意の凝縮物質に対して，X の粗視化をすることでその凝縮系物質を幾何学的に再現できる．

ここで，命題 1 に見られるような分解空間を通した物の考え方は，物性物理学における物質の構造解析の考え方に類似していることに注意しよう．実際，結晶の回折像はある種の分解空間としてみなすことができる．

さて，上記の A), B) を統一的に議論するために，両結果において，空間の 0-dim, perfect, compact なる性質が共通していることに着目する．これによって，位相空間 (X, τ) が 0-dim, perfect, compact T_2 空間とすると，A), B) から，0-dim, perfect, compact なある分解空間の列 $\{S, \mathcal{D}^1, \mathcal{D}^2, \cdots\}$ が存在し ($S = (X, \tau)$)，さらに任意の compact な距離空間 δ に対して， 各分解空間 $\mathcal{D}_i$ から δ への連続全射が存在する．そしてこの連続全射を用いて，各 $\mathcal{D}_i$ の分解空間で δ に同相な空間が生成される．下図は，今述べた状況を模式的に表したものである．

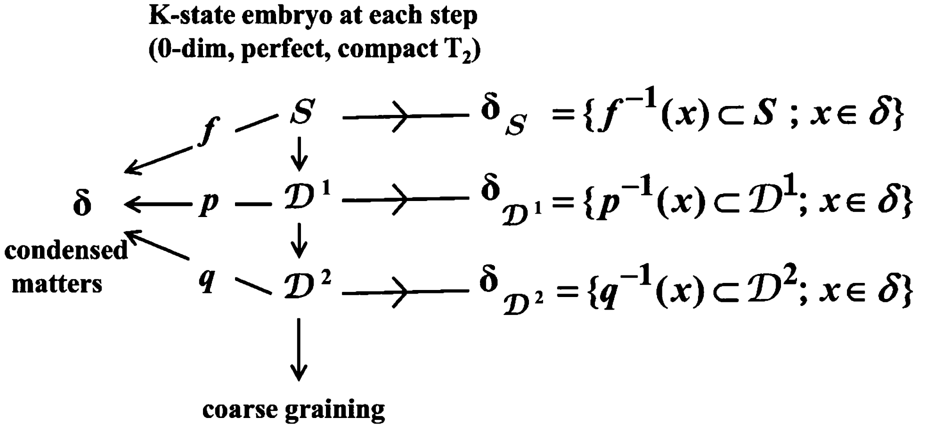

図 1: $S, \mathcal{D}^1, \mathcal{D}^2, \cdots$ は 0-dim, perfect, compact なる粗視化列，$f, p, q, \cdots$ は凝縮系物質 δ への連続全射，そして $\delta_S, \delta_{\mathcal{D}^1}, \delta_{\mathcal{D}^2}$ は δ に同相な，$S, \mathcal{D}^1, \mathcal{D}^2$ の各分解空間を表している．

結論として，はじめの物質の状態 X が K 状態であれば，その状態を保存する粗視化列が得られ，dendrite のような凝縮系物質は，各粗視化層の別の粗視化によって必ず表現できることが分かった．このような物質構造形成の階層構造は，状態 K が起因して起こるものであり， この意味でこの状態が，物質の構造形成の内在的本質である事が示唆される．

以上の議論の物質科学への適用例として，結晶学，鉱物学にみられる問題「自己相似構造をもつ結晶によって，それらの集合体である多結晶を埋め尽くすことができるかどうか」に対する十分条件を導出することが可能である．ここでは，さらに問題を一般化し，「compact な構造 (例えば dendrite 構造など) をもつ結晶によって，それらの集合体である多結晶を埋め尽くすことができるかどうか」という問題に対して，その十分条件を導出しよう [12].

今，上記の問題の数学的模式図を図 2 に示す．

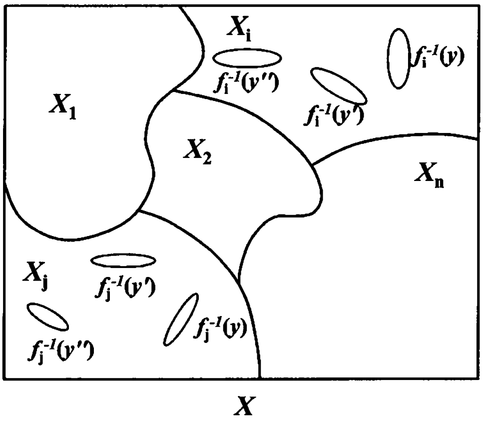

図 2: 多結晶 X とそれを埋め尽く単結晶 X_i の数学的模式図

ここで，位相空間 $(X,\tau) = (\{0,1\}^\Lambda, \tau_0^\Lambda)$ を考えよう．ただし，$(\{0,1\}^\Lambda, \tau_0^\Lambda)$ は $(\{0,1\}, \tau_0)$ の $\Lambda-$ 積の空間であり，τ_0 は $\{0,1\}$ の離散位相である．また，$Card\Lambda \succ \aleph_0$ とする．この時，(X,τ) は 0-dim, perfect, compact な T_2 空間となる．注意として，もし $Card\Lambda \succ \aleph$ ならば，この空間は距離化可能ではない．この時，(X,τ) の直和 $\{X_1,\ldots,X_n\}, X_i \in (\tau \cap \Im) - \{\phi\}$ が存在し，各部分空間 (X_i, τ_{X_i}) は 0-dim, perfect, compact な T_2 空間となる．今，多結晶 X を位相空間 (X,τ) と，そして各単結晶 X_i を部分空間 (X_i,τ_{X_i}) とみなす．すなわち，多結晶 X が K 状態によって特徴づけられていると考えるわけである．したがって，多結晶 X は単結晶 X_i によって，直和の意味で埋め尽くされている．すなわち，$X = \cup_{i=1}^n X_i, X_i \cap X_j = \phi, i \neq j$. さて，各単結晶 X_i もまた 0-dim, perfect, compact な T_2 空間であることから，B) を用いることで，dendrite や自己相似のような compact な構造 (δ, τ_d) に対して連続全射 $f_i : (X_i, \tau_{X_i}) \to (\delta, \tau_d)$ が存在し，f_i を介した X_i の分解空間 $\mathcal{D}_i$ と δ とは同相となる．すなわち $h_i : (\delta,\tau_d) \to (\mathcal{D}_i, \tau(\mathcal{D}_i)), y \mapsto f_i^{-1}(y)$ は同相写像となる．ただし，$\mathcal{D}_i = \{f_i^{-1}(y) \subset X; y \in \delta\}$, $\tau(\mathcal{D}_i) = \{\mathcal{U} \subset \mathcal{D}_i; \bigcup \mathcal{U} \in \tau_{X_i}\}$ である．図 2 の各 $f_i^{-1}(y)$ は分解空間 $\mathcal{D}_i$ の点を表している．したがって，各単結晶 X_i は粗視化を通して，compact な構造を有することが分かった．ここで，この粗視化と元の単結晶とを同一視して，$\mathcal{D}_i$ を compact な構造をもった単結晶として捉える．

続いて, 分解空間 $\mathcal{D}_i, i = 1, \cdots, n$ によって (X, τ) はどのような意味において埋め尽くされているのか調べよう． 今, 次の (i), (ii) が成立する． (i)X の部分集合の族 $\{f_i^{-1}(y); y \in Y, i = 1, \ldots, n\}$ は X の被覆である．すなわち, $X = \bigcup\{f_i^{-1}(y); y \in Y, i = 1, \ldots, n\}$ が成立する．(ii) 各 $\mathcal{D}_i$ は互いに素である．すなわち, $\mathcal{D}_i \cap \mathcal{D}_j = \phi, i \neq j$ となる．したがって, (i), (ii) の意味において, 多結晶 X は compact な構造をもった単結晶 $\mathcal{D}_i$ によって埋め尽くされる．ここで, 実際の結晶内に見られる dendrite の結晶成長 (単結晶の成長) を見てみると, 異なるソースから成長しはじめた dendrite は成長過程で結合することなく成長し終わることが知られている．このとき, 二つの dendrite 間は結晶粒界となっている．これらの実験事実は, 今回求めた dendrite 構造のような compact 構造をもつ単結晶が, 互いに共通部分を持たないという事実に矛盾しない．以上を踏まえ, はじめの問題「compact な構造 (例えば dendrite 構造など) をもつ結晶によって，それらの集合体である多結晶を埋め尽くすことができるかどうか」 に戻ると, 「多結晶が K 状態なる幾何学的状態である」ことがその十分条件であることが結論づけられる．実際このとき, X を埋め尽くすところの compact な構造をもつ単結晶を数学的に構成することができるわけである．

今回, 問題 (*) として, はじめの X の構造がどのように幾何学的に特徴づけられていれば，目的の物質 S をもつところの, X の粗視化（分解空間）が存在するかという, 今までの物質構造論では取り扱われることがなかった新たな視点で議論を行った．その結果, 物質の構造形成に内在する幾何学的特徴として K 状態というものを提案した．今後, このような視点をもちつつ, 物質の物性を考慮に入れた物質構造論の発展が望まれる。

参考文献

[1] N. E. Cusack, *The Physics of Structurally Disordered Matter: An Introduction* (Univ. Sussex Press, 1987).

[2] S. R. Elliott, *Physics of Amorphous Materials, 2nd ed.* (Longman, 1990).

[3] W. Steurer and S. Deloudi, *Crystallography of Quasicrystals: Concepts, Methods and Structures* (Springer, 2009).

[4] Y. Katayama, T. Mizutani, W. Utsumi, O. Shimomura, M. Yamakata, and K. Funakoshi, Nature (London) 403, 170 (2000).

[5] T. Morishita, Phys. Rev. Lett. 87, 105701-1 (2001).

[6] S. Ohmori, T. Yamamoto, and A. Kitada, arXiv:1708.02748v1 [math-ph] 9 Aug (2017).

[7] A. Fernandez, J. Phys. A 21 295 (1988).

[8] A. Kitada, T. Yamamoto, S. Ohmori, and Y. Yamazaki, arXiv:1402.7290v2 [math.GN] 22 Mar (2014).

[9] 北田韶彦, 位相空間とその応用, 朝倉書店 (2011).

[10] S. B. Nadler, Jr. *Continuum theory.* (Marcel Dekker, 1992).

[11] R. Engelking, *General Topology* (Heldermann Verlag Berlin 1989).

[12] A. Kitada, S. Ohmori and T. Yamamoto, J. Phys. Soc. Jpn. 85, 045001 (2016).